Modélisation Tridimensionnelle et Multi-échelles du Comportement des Matériaux Cimentaires - Application à la Lixiviation

Siham Kamali-Bernard, Fabrice Bernard, William Prince, Mohammed Hjiaj

Laboratoire de Génie Civil et Génie Mécanique - EA 3913
INSA
20 Avenue des Buttes de Coësmes
35043 Rennes Cedex

Siham.Kamali-Bernard@insa-rennes.fr

RÉSUMÉ. *Une modélisation 3D et multi-échelles du comportement physico-chimique et mécanique du matériau cimentaire est développée. L'hétérogénéité du matériau est représentée dans des volumes élémentaires représentatifs des différentes échelles d'études. Les propriétés physico-chimiques et mécaniques à une échelle se déterminent à partir de celles de l'échelle inférieure. L'échelle de la microstructure, ici l'échelle des hydrates est modélisée en utilisant le code CEMHYD3D. Ce logiciel est ensuite couplé au logiciel ABAQUS pour le calcul des propriétés mécaniques. La démarche est ainsi appliquée pour l'étude du comportement mécanique d'un mortier à E/C=0, avant et après lixiviation par l'eau. Les résultats des simulations sont en bon accord avec ceux de l'expérimentation.*

ABSTRACT. *3D multi-scale and multi-physics modeling of cement based materials is developed. Two numerical tools are combined to predict the mechanical behavior of these materials CEMHYD3D and ABAQUS. The outcomes of the simulation at the micro-scale are used at the meso-level modeling. This approach is then applied to investigate the mechanical behaviour of a mortar with water-to-cement ration equal to 0.4. The effect of the leaching phenomenon is studied. The numerical results of the modeling are consistent with the experimental ones.*

MOTS-CLÉS : *modélisation multi-échelles, microstructure, comportement mécanique, lixiviation, ciment.*

KEYWORDS: *Multi-scale modeling, microstructure, mechanical behavior, leaching, cement.*

Introduction et contexte

La durabilité des ouvrages en béton est une préoccupation de plus en plus mise en avant par les gestionnaires d’ouvrages. Ces derniers exigent des durées de vie de plus en plus longues avec un minimum d’entretien. Or la durabilité des ouvrages en béton est étroitement liée à celle du béton lui-même. Ce dernier est un matériau hétérogène et poreux en équilibre chimique réagissant avec son environnement. L’étude de sa durabilité fait intervenir des couplages entre plusieurs disciplines : chimie, physique et mécanique, ceci à diverses échelles de la nanostructure à la macrostructure. Les études expérimentales des phénomènes liés à la durabilité nécessitent souvent un temps très long et les résultats sont parfois difficiles à exploiter. La simulation numérique est un outil précieux qui permet un gain de temps conséquent mais aussi une meilleure compréhension des phénomènes mis en jeu. La prédiction du comportement physico-chimique et mécanique du béton et de la structure au cours du temps nécessite le développement et l’utilisation de modèles couplés. La robustesse de la modélisation est étroitement liée à la qualité de la représentativité du matériau numérique lui-même et des phénomènes mis en jeu.

Les travaux menés ici visent à développer une modélisation tridimensionnelle et multi-échelles du comportement physico-chimique et mécanique du matériau cimentaire. La modélisation multi-échelles et multi-physiques est rendue aujourd’hui possible grâce aux progrès informatiques et au développement d’outils numériques puissants. L’approche développée consiste à représenter l’hétérogénéité du matériau dans des volumes élémentaires représentatifs des différentes échelles d’études (micro-méso). Les propriétés physico-chimiques et mécaniques à une échelle se déterminent à partir de celles de l’échelle inférieure. L’échelle de la microstructure, ici l’échelle des hydrates (quelques microns) est modélisée en utilisant le code CEMHYD3D développé par le NIST/USA (Bentz, 1997). Ce logiciel est ensuite couplé à un autre logiciel, ABAQUS, dédié aux calculs mécaniques et de transferts.

Nous présenterons d’abord la démarche et la méthodologie adoptée. Ensuite, nous l’appliquerons pour l’étude d’un mortier à E/C = 0,4. Nous nous intéresserons plus particulièrement au comportement mécanique du matériau sous traction et compression et ensuite à sa durabilité vis-à-vis de la lixiviation par l’eau pure. Les résultats des simulations seront confrontés aux résultats expérimentaux.

2. Descriptif de la démarche et de la méthodologie

La démarche adoptée ici comporte deux étapes principales, schématisée dans la figure 1 et décrite ci-dessous :

Etape 1 : Représentation numérique en 3D du matériau étudié

Le béton est un matériau composite hétérogène composé d’un squelette granulaire enrobé dans une matrice poreuse constituée par la pâte de ciment

hydratée. La granulométrie du squelette granulaire varie du micron à la dizaine de millimètres. Trois échelles sont nécessaires pour décrire son comportement :

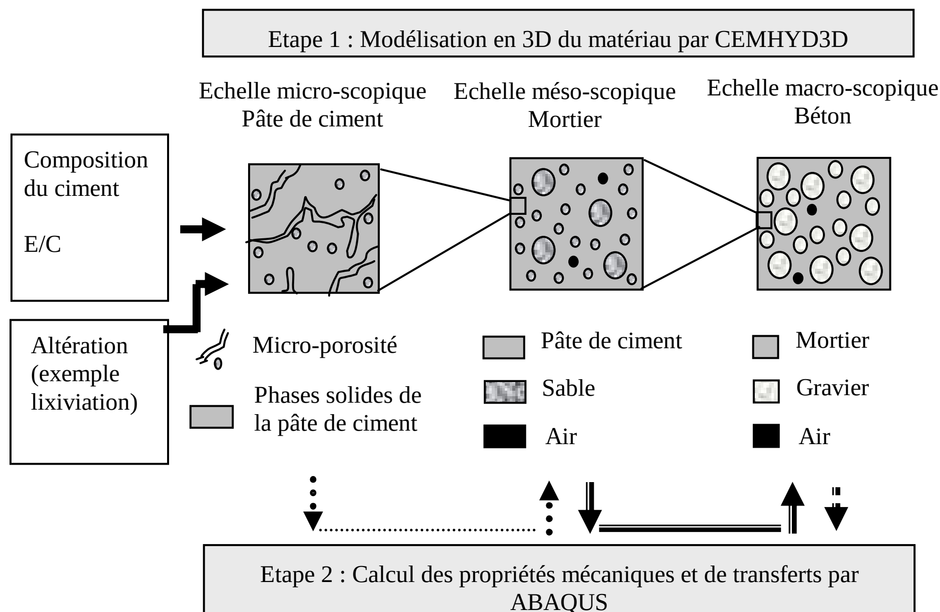
Echelle macroscopique : le matériau est modélisé comme un empilement granulaire 3D compact de grains de dimensions comprises entre quelques mm et quelques dizaines de mm (gravillon), enrobés par un mortier. La zone d'interface entre les grains et la matrice appelée auréole de transition a des caractéristiques mécaniques et des propriétés de transfert différentes de celle de la pâte de ciment du mortier. Les propriétés du mortier sont déduites de la mésostructure générée à l'échelle mésoscopique.

Echelle mésoscopique : le mortier est décrit comme un empilement compact 3D de grains de dimensions comprises entre une centaine de microns et quelques millimètres (sable), enrobés par une pâte de ciment durcie. Les propriétés de la pâte de ciment sont déduites de la microstructure générée à l'échelle microscopique.

Echelle microscopique: la pâte de ciment durcie est décrite à partir de la composition du ciment et du rapport E/C comme un assemblage poreux 3D composé:

- de phases hydratées telles que les silicates de calcium hydratés, la portlandite, les sulfo-aluminates de calcium hydratés (ettringite, monosulfoaluminate), etc...

- de phases anhydres ou en cours d'hydratation telles que les silicates de calcium et les aluminates de calcium.



Figue1. *Schémas illustrant la démarche de modélisation multi-échelles adoptée*

Etape 2 : Calcul des propriétés mécaniques et de transfert du matériau sain ou altéré

Le matériau 3D généré dans l'étape précédente est ici repris par un autre logiciel plus dédié à la mécanique et à l'étude des phénomènes de transferts : ici le logiciel ABAQUS. L'image pixélisée est alors transformée en un maillage Eléments Finis utilisable par ce logiciel. Chaque voxel représentant une phase du matériau est alors considéré comme une maille cubique dans ABAQUS. L'altération peut aussi être directement prise en compte dans cette étape.

3. Application de la méthodologie à l'étude d'un mortier

3.1. *Matériau*

La méthodologie développée plus haut a été appliquée à un mortier qui a fait l'objet d'une étude expérimentale antérieure (Kamali, 1999) et (Le Bellego, 2001) afin de caractériser son comportement sous l'effet de sollicitation de compression, traction, flexion avant et après lixiviation par du nitrate d'ammonium. Sa composition ainsi que celle du ciment le constituant sont décrites dans ces références. Ce mortier à base de ciment portland CEM I 42,5 a un rapport E/C égal à 0,4. Notre étude sera donc limitée aux échelles micro et méso.

3.2. *Etude du matériau sain*

3.2.1. *Modélisation de la microstructure de la pâte de ciment et de la mésostructure du mortier*

Un cube de pâte de ciment portland à E/C=0,4 de 100 x 100 x 100 voxels est simulé, chaque voxel correspond à 1 μm^3. La figure 2 présente une coupe 2D de l'image 3D représentant la pâte hydratée. Les quantités d'hydrates et la valeur de la porosité capillaire sont données dans le tableau 1.

Tableau 1. *Teneur en hydrates et porosité capillaire de la pâte de ciment hydratée d'après CEMHYD3D*

Porosité	CH	C-S-H	(C_3AH_6, AFm et AFt)
17%	14,7%	40,2%	17,9%

La mésostructure du mortier est représentée par un cube élémentaire de 5 mm de côté contenant une quantité X1 de sphères de diamètre 1,125 mm, une quantité X2 de sphères de diamètre 0,125 mm et une quantité X3 de sphères de diamètre 0.375. Les quantités, X1, X2 et X3 s'obtiennent à partir respectivement des teneurs volumiques en sable S1, S2 et en bulles d'air. Autour des gros grains de diamètre 1,125 mm, il est possible de prendre en compte la présence d'une auréole de

transition. La figure suivante présente une coupe 2D d'un cube de mm de côté issu de la mésostructure 3D du mortier simulé.

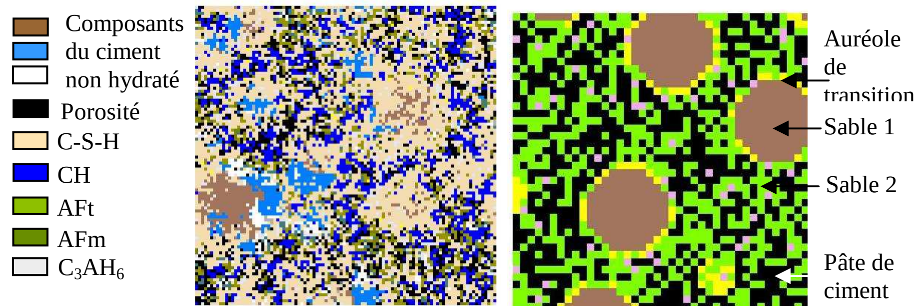


Figure 2. *Images 2D de la microstructure 3D de la pâte de ciment hydratée (gauche) et image 2D de la mésostructure 3D du mortier simulé (droite)*

3.2.2. *Calcul des propriétés mécaniques du mortier*

Pour des raisons de capacité de mémoire, les calculs mécaniques avec ABAQUS ont été réalisés sur des cubes élémentaires de 50 µm de côté pour la pâte de ciment et 5 mm pour le mortier. D'après Kanit et al (2003), la représentativité d'un volume élémentaire peut-être vérifiée en imposant différentes conditions aux limites (conditions homogènes en déplacements ou en forces). Ce critère a été vérifié pour les volumes élémentaires considérés dans cette étude. L'auréole de transition n'est pas prise en compte.

Les caractéristiques de la pâte de ciment hydratée ont d'abord été calculées. Une maille cubique représente les dimensions d'un voxel de $1 \mu m^3$. A chaque phase de la pâte de ciment ont été attribuées des caractéristiques mécaniques : module élastique, coefficient de Poisson, résistance à la traction. Les valeurs de module élastique et de coefficient de Poisson des différentes phases considérées sont obtenues par nano-indentation. Elles sont issues de la littérature et ont déjà été présentées auparavant (Kamali, 2004). La valeur de la résistance à la traction d'une phase est considérée proportionnelle au module élastique (f_t = E/10000). Un critère de Rankine est considéré pour la rupture des différentes phases. A l'échelle de la mésostructure (mortier), un modèle de fissuration diffuse (Hillerborg, 1976) est utilisé pour prendre en compte le comportement en traction de la pâte de ciment hydraté. Les paramètres de ce modèle (résistance en traction, courbe contrainte-déplacement post-rupture) sont identifiés par calage sur la courbe contraintes-déformation en traction du VER de pâte de ciment. Les grains de sable suivent le même type de comportement.

Par ailleurs, à cette échelle, la rupture est supposée être la conséquence d'états de contraintes de traction locaux générés par l'hétérogénéité du matériau. Ainsi la seule connaissance du comportement en traction de la pâte de ciment est suffisante pour obtenir à la fois la réponse du mortier à une sollicitation de traction et de

compression. La figure 3 montre les courbes contraintes-déformations du mortier et permet de conclure que les résultats de la modélisation sont proches des résultats expérimentaux. Les faciès de fissuration sont également bien représentés (figure 4).

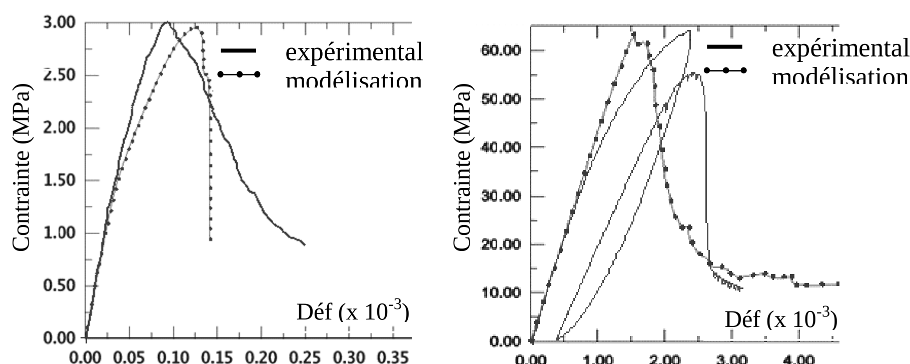


Figure 3. *Comportement sous chargement de traction (gauche) et de compression (droite) du mortier considéré - Comparaison modélisation/expérimentation*

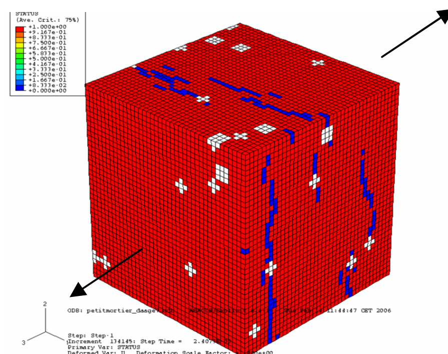


Figure 4. *Etat de fissuration (mailles de couleur foncée) du mortier numérique sous chargement de traction donné par ABAQUS.*

3.3 Effet de la lixiviation sur le comportement mécanique du mortier

3.3.1. Mécanismes physico-chimiques de la lixiviation

La lixiviation par l'eau entraîne la dissolution de certaines phases solides de la pâte de ciment hydraté. Le mécanisme a été longuement étudié et décrit par plusieurs auteurs (Adenot, 1999) (Carde, 1996). La dégradation est caractérisée par la

présence de fronts nets de dissolution-précipitation délimitant ainsi des zones de caractéristiques physico-chimiques et mécaniques différentes. La portlandite (CH) est la phase la moins stable de la pâte cimentaire, elle se dissout en premier. Il a été montré par plusieurs auteurs que ce phénomène d'origine physico-chimique entraîne une chute des propriétés mécaniques : module élastique, résistance à la flexion et compression (Carde, 1996) (kamali,1999) (Le Bellégo, 2001), angle de frottement interne (Heukamp, 2001). Récemment, Kamali et al (2004) ont montré que la lixiviation de la portlandite uniquement peut entraîner une chute de module élastique d'environ 50% pour une pâte de ciment. Dans cette étude, nous nous intéressons au comportement global du matériau (zone élastique-pic-post pic).

3.3.2. Effets de la lixiviation sur le comportement en compression et traction du mortier

Seul l'effet de la lixiviation de la portlandite est étudié. La teneur volumique en portandite de la pâte de ciment est d'environ 15%. Cet hydrate est la phase la moins stable de la pâte cimentaire, elle se dissout en premier créant une porosité supplémentaire non-négligeable. Sa dissolution est modélisée en affectant aux éléments finis la représentant les caractéristiques de l'eau. En suivant la même méthodologie qu'au paragraphe 3.2, il est possible de présenter les résultats la modélisation concernant le comportement en compression du mortier après dissolution de la portlandite. La dissolution de la portlandite entraîne une chute d'environ 32% du module élastique (de 42 GPa à 29 GPa) et d'environ 40% de la résistance à la compression (de 63 MPa à 38 MPa) du mortier étudié. Le comportement post-pic parait plus ductile après lixiviation de la portlandite. Ces résultats sont en accord avec les observations expérimentales trouvées dans la littérature (Carde, 1996) (Kamali, 1999) (Le Bellégo, 2001).

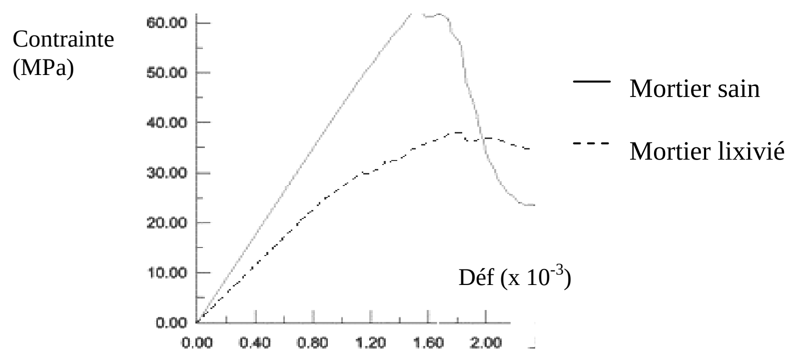


Figure 5. *Comportement en compression du mortier avec et sans portlandite (CH)*

4. Conclusion et perspectives

Une approche de modélisation multi-échelles du micro au macro pour la prédiction et l'évaluation des propriétés mécaniques et de transfert des matériaux cimentaires est présentée. Deux codes de calcul sont utilisés, CEMHYD3D pour la génération de la micro et la méso-structure et ABAQUS pour le calcul des propriétés mécaniques. L'approche a été appliquée pour l'étude du comportement sous chargement de traction et de compression d'un mortier à E/C=0,4. L'effet de la lixiviation de la portlandite sur la diminution du module élastique et de la résistance à la compression et sur l'augmentation de la ductilité sont présentés. Les résultats de la modélisation sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. L'influence de l'auréole de transition n'a pas été prise en compte, elle est une des perspectives de ce travail avec l'évaluation de la diffusivité et de la perméabilité.

5. Bibliographie

Adenot F., Durabilité du béton: Caractérisation et modélisation des processus physiques et chimiques de dégradation du ciment, Thèse de doctorat, Université d'Orléans, 1992.

Bentz D.P., « Three-Dimensional Computer simulation of Portland Cement Hydration and Microstructure Development », *Journal of American Ceramic Society*, vol. 80, n°1, 1997, p. 3-21.

Carde C., Caractérisation et modélisation de l'altération des propriétés mécaniques due à la lixiviation des matériaux cimentaires, Thèse de doctorat, INSA de Toulouse, 1996.

Heukamp P.H., Ulm F.J., Germaine J.T., « Mechanical properties of calcium leached cement pastes : triaxial stress and the influence of the pore pressure », *Cement and Concrete Research*, vol. 31, n°5, 2001, p. 767-774.

Hillerborg A., Modeer M., Petersson P.E., « Analysis of Crack Formation and Crack Growth in Concrete by Means of Fracture Mechanics and Finite Elements », *Cement and Concrete Research,* n°6, 1976, p. 773–782.

Kamali S., Identification de la loi de comportement mécanique d'un mortier lixivié par du nitrate d'ammonium, Rapport de DEA, 1999, Ecole Normale Supérieure de Cachan.

Kamali S., Comportement et simulation des matériaux cimentaires en environnements agressifs : lixiviation et température, Thèse de doctorat, LMT-ENS de Cachan, 2003.

Kamali S., Moranville M., Garboczi Ed., Prené S., Gérard B., Hydrate dissolution influence on the Young's modulus of cement pastes, *Conférence Internationale FraMCos* / Vail, Colorado/USA/12-16 Avril, 2004, p.631-638.

Kanit T., Forest S., Galliet I., Mounoury V., Jeulin D., « Determination of the size of the representative volume element for random composites », *International Journal of Solids and Structures, Vol.* 40, n°13-14, 2003, p. 3647-3679.

Le Bellégo C., Couplage chimie mécanique dans les structures en béton armé attaquées par l'eau, Thèse de doctorat, LMT-ENS de Cachan, 2001.